



TITLE:

Ce化合物の混合原子価状態と4f準位(VI. 理論,価数揺動状態の総合的研究,科研費研究会報告)

AUTHOR(S):

上田, 和夫

CITATION:

上田, 和夫. Ce化合物の混合原子価状態と4f準位(VI. 理論,価数揺動状態の総合的研究,科研費研究会報告). 物性研究 1982, 37(5): 94-96

ISSUE DATE:

1982-02-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/90460>

RIGHT:

Ce 化合物の混合原子価状態と 4f 準位

東大工学部 上田和夫

[1] 最近の Ce および Ce 化合物の光電子放出の実験によれば混合原子価状態に近いと思われる物質でも 整数原子価である限り 4f 準位のフェルミ準位から測った binding エネルギーは 2~3 eV あることが報告されている。これに対し混合原子価状態にある CePd_3 では 4f 準位からのスペクトルが確かにフェルミ準位の所にある。これらの実験事実は δ - α 型転移が 1 次であることと共に f 電子と d (伝導) 電子の δ - α 型転移において重要であることを示唆している。そこで f-d δ - α (Falicov-Kimball) 相互作用を持つ periodic Anderson model を考える。

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} d_{\mathbf{k}\sigma} + E_0 \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma} + U \sum_i n_{fi\uparrow} n_{fi\downarrow} \\ & + \sum_{\mathbf{k}\sigma} V (d_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} + f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} d_{\mathbf{k}\sigma}) \\ & + \frac{G}{N_0} \sum_{i\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} \left(\sum_{\mathbf{r}} n_{fi\mathbf{r}} - 1 \right) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_i} d_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} d_{\mathbf{k}'\sigma} \end{aligned}$$

[2] 我々は比較的高エネルギー (eV 程度) の現象について考えているので alloy analogy - CPA を用いることにする。今のハミルトニアンに対する alloy analogy は

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_A = & \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} d_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{i\sigma} \epsilon_i d_{i\sigma}^{\dagger} d_{i\sigma} + \sum_{i\sigma} E_{i\sigma} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma} \\ & + \sum_{\mathbf{k}\sigma} V (d_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} + f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} d_{\mathbf{k}\sigma}) \end{aligned}$$

と書ける。ここで ϵ_i および $E_{i\sigma}$ は次に示す確率変数である。

$$\epsilon_i = \begin{cases} 0 & \sum_{\sigma} \langle n_{f\sigma} \rangle \\ -G & 1 - \sum_{\sigma} \langle n_{f\sigma} \rangle \end{cases}$$

$$E_{i\sigma} = \begin{cases} E_0 & 1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle \\ E_0 + U & \langle n_{f-\sigma} \rangle \end{cases}$$

この alloy の問題を CPA で扱うには 次の有効ハミルトニアンを
考えればよい。

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{eff}(z) = & \sum_{k\sigma} [\epsilon_k + \Sigma_d(z)] d_{k\sigma}^\dagger d_{k\sigma} + \sum_{i\sigma} \Sigma_f(z) f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \\ & + \sum_{k\sigma} V\tau(z) (d_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} + f_{k\sigma}^\dagger d_{k\sigma}) \end{aligned}$$

この問題に対しては d 電子 および f 電子に対するコヒーレント ポテン
シャル Σ_d, Σ_f だけでなく mixing の renormalization 因子 $\tau(z)$ が
必要である。 Σ_d, Σ_f, τ は 通常通り T-matrix のランダム平均が
零という条件で 自己無撞着に決められる。

[3] 非摂動の d 電子の状態密度を 半ば円形にとり 原子当りの電子数
を 1.7 とし $V = 0.3$ (単位は band 中の半分) として数値計算を行った。
図 1 は G の大きさを a $G = 0.0$, b $G = 0.4$, c $G = 0.8$,
d $G = 1.2$ とした時の f 電子数と 4f 準位の binding エネルギー
を示している。 G を増加させるとともに n_f の変化は激しくなり G が
band 中程度になると 1 次転移をおこす。 この時 4f 準位の
binding エネルギーは eV 程度の跳びを示す。 これは定性的に
 γ - α 型転移と γ 相での大きな binding エネルギーを説明して
いる。 2 図には $G = 0.8$ の時 整数原子価 [a) $n_f \sim 1$, c) $n_f \sim 0$]
および 非整数 [b) $n_f \sim 0.5$] の典型的な例に対して d (鎖線)
および f (点線) の状態密度 (実線は簡単化した CPA) を 示し
てあり d 電子が f^0 -configuration を screen するようすと表わし
ている。

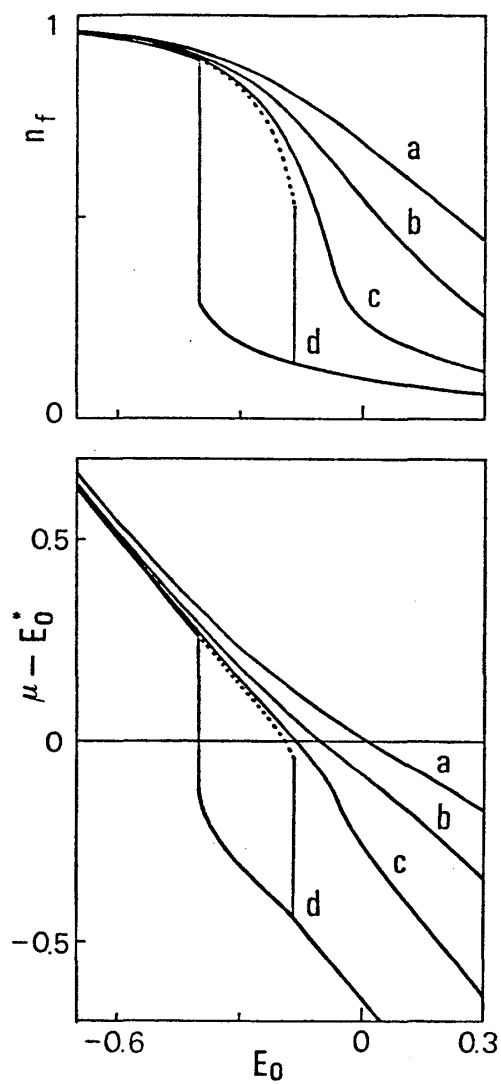


图 1.

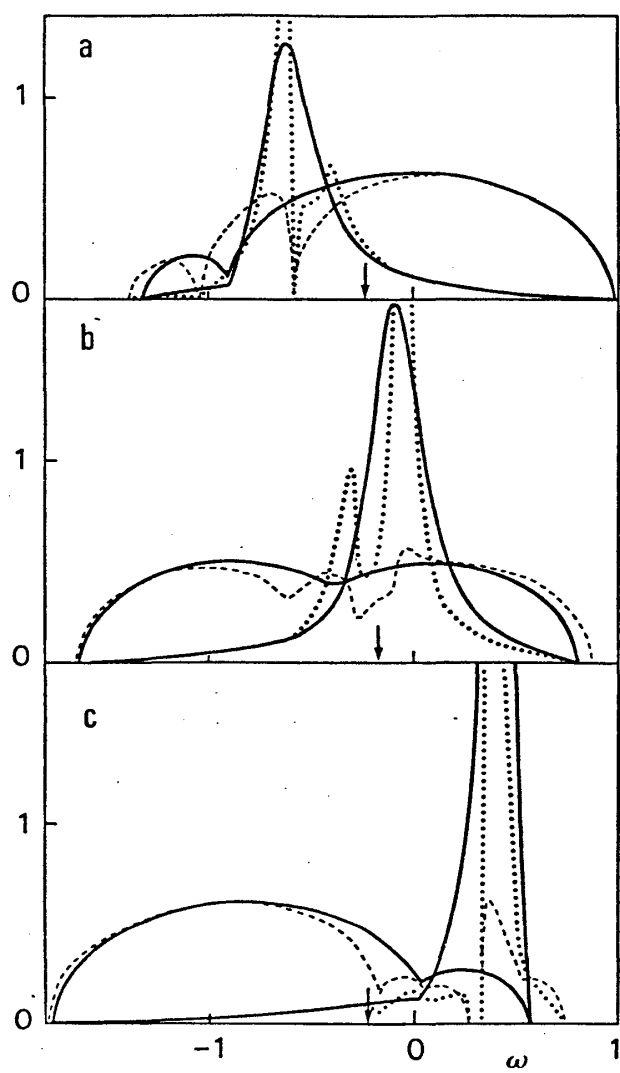


图 2.